Universität Bonn
Physikalisches Institut
Prof. Dr. Hans Kroha, Tim Lappe

11.07.2017
Sommersemester 2017
http://www.kroha.uni-bonn.de

Theoretische Physik III – Quantenmechanik
Übungsblatt 11

(Abgabe: 18.07.2017, Besprechung: 20./21.07.2017)

–Hausaufgaben–

H 11.1 Stark-Effekt — 15 Punkte

Betrachte ein Wasserstofiatom in einem homogenen, konstanten elektrischen Feld $\mathbf{E}$.

a) Begründe, warum das Feld $\mathbf{E}$ ein zusätzliches elektrisches Potential, $\lambda V = -\mathbf{E}\cdot\mathbf{d}$ bewirkt, mit dem Dipolmoment $\mathbf{d} = -e\mathbf{x}$. Betrachte dies nun als Störung.

b) Sei $\mathbf{E} = |\mathbf{E}|\mathbf{e}_z$. Zeige, dass in Polarkoordinaten $\lambda V(r,\vartheta,\varphi) = e|\mathbf{E}|r\cos\vartheta$ lautet.

c) Zeige, dass die Matrixelemente von λV nur zwischen Zuständen verschiedener Parität und gleicher m-Quantenzahl nicht verschwinden.

d) In welcher Ordnung der Störungstheorie verschiebt sich die Energie des Grundzustandes des Atoms im Feld $\mathbf{E}$? Berechne die Energie und die Zustandsbeimischungen in jeweils niedrigster Ordnung (betrachte nur Beiträge mit $n \leq 2$). Dieser Effekt ist quadratisch in $\mathbf{E}$ und heißt daher quadratischer Stark-Effekt.

e) Das Energieniveau $n = 2$ des ungestörten Atoms ist vierfach entartet. Berechne die gestörten Wellenfunktionen $|n^1\rangle$ und ihre Energien in erster Ordnung Störungstheorie durch vorheriges Diagonalisieren der Matrix von λV. Dieser Effekt ist linear in $\mathbf{E}$ und heißt daher linearer Stark-Effekt.

f) Berechne die Erwartungswerte $\langle n^1|d_z|n^1\rangle$ des induzierten Dipolmomentes.

Hinweis: Benutze die Formeln für die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms (8.67-8.70) im Skript.

H 11.2 Wasserstoffatom und Runge-Lenz-Vektor — 20 Punkte

Die $(2l+1)$-fache Entartung des Energiespektrums des Wasserstoffatoms ist eine Konsequenz der Erhaltung des Drehimpulses. Die totale n^2-Entartung im Wasserstoffatom ist die Konsequenz einer weiteren Erhaltungsgröße, des Runge-Lenz-Vektors. Dieser ist eine Erhaltungsgröße des Kepler-Problems, und zwar der gebundenen Orbits (mit negativer Energie) in einem Potential der Form $1/r$. Störungen dieser $1/r$-Abhängigkeit führen zu einer Drehung des Vektors, die sich als Periheldrehung im Falle des Merkurs sogar beobachten lässt. Der Runge-Lenz-Vektor ist gegeben durch ($r = |\mathbf{x}|$)

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2\mu}(\mathbf{p}\times\mathbf{L} - \mathbf{L}\times\mathbf{p}) - \frac{e^2}{r}\mathbf{x}, \tag{1}$$

wobei μ die reduzierte Masse bezeichnet und $\mathbf{x}$, $\mathbf{p}$ und $\mathbf{L}$ die Orts-, Impuls- und Drehimpulsoperatoren. Für diese Aufgabe setzen wir $\hbar = 1$.

a) $\mathbf{M}$ ist eine Erhaltungsgröße. Welche zentrale Relation zwischen $\mathbf{M}$ und dem Hamilton-Operator H folgt daraus? Was gilt für $\mathbf{L}$ und H?

b) Zeige die Kommutatorrelation $[L_i, M_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk} M_k$.

Im weiteren Verlauf der Aufgabe benötigen wir außerdem folgende Relationen:

(i) Beziehung zwischen Hamilton-Operator und Runge-Lenz-Vektor:

$$\mu M^2 = 2H(L^2 + 1) + \mu e^4.$$

(ii) Orthogonalität von Drehimpulsvektor und Runge-Lenz-Vektor: $\mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = 0$.

(iii) Kommutatorrelationen von $\mathbf{M}$: $[M_i, M_j] = -2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk} H L_k / \mu$.

Beachte: aus der letzten Relation folgt, dass die Operatoren $(H, \mathbf{M}, \mathbf{L})$ eine *geschlossene Algebra* bilden. Wir führen auch den folgenden neuen Operator ein:

$$\mathbf{N} = \sqrt{\frac{\mu}{2|E|}}\,\mathbf{M}. \tag{2}$$

c) Folgere aus a), dass es möglich ist, den Hamilton-Operator H in (i) und (iii) durch seinen Eigenwert E zu ersetzen. Bedenke dabei, dass wir gebundene Zustände betrachten. Schreibe den Kommutator $[N_i, N_j]$ auf.

d) Benutze (i) und Gl. (2), um für die Energie zu zeigen:

$$E = -\frac{\mu e^4}{2(L^2 + N^2 + 1)}. \tag{3}$$

Nun müssen noch die Eigenwerte von N^2 bestimmt werden. Dazu definieren wir zwei weitere Operatoren als $\mathbf{F}^{(\pm)} = (\mathbf{L} \pm \mathbf{N})/2$.

e) Zeige, dass die $\mathbf{F}^{(\pm)}$ Drehimpulsoperatoren sind und dass sie miteinander kommutieren, mit anderen Worten

$$[F_i^{(\pm)}, F_j^{(\pm)}] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk} F_k^{(\pm)} \quad \text{und} \quad [F_i^{(+)}, F_j^{(-)}] = 0. \tag{4}$$

f) Zeige $\mathbf{L} = \mathbf{F}^{(+)} + \mathbf{F}^{(-)}$ und $L^2 + N^2 = 2\left[(\mathbf{F}^{(+)})^2 + (\mathbf{F}^{(-)})^2\right]$.

g) Wir haben jetzt also zwei Sätze Drehimpulsoperatoren $\{(\mathbf{F}^{(\pm)})^2, F_z^{(\pm)}\}$ (nicht zu verwechseln mit den Leiteroperatoren des Drehimpulses $L_\pm$) mit entsprechenden Eigenzuständen

$$(\mathbf{F}^{(\pm)})^2 \left| l_\pm, m_\pm \right\rangle = l_\pm(l_\pm + 1) \left| l_\pm, m_\pm \right\rangle, \quad F_z^{(\pm)} \left| l_\pm, m_\pm \right\rangle = m_\pm \left| l_\pm, m_\pm \right\rangle. \tag{5}$$

Die Gesamteigenzustände sind $|l_+, m_+; l_-, m_-\rangle = |l_+, m_+\rangle \otimes |l_-, m_-\rangle$. Die möglichen Eigenwerte sind $l_\pm = 0, \frac{1}{2}, 1, ...$ und $m_\pm = -l_\pm, ..., 0, ..., l_\pm$. Zeige mittels (ii)

$$(\mathbf{F}^{(+)})^2 - (\mathbf{F}^{(-)})^2 = \frac{1}{2}\left[\mathbf{L} \cdot \mathbf{N} + \mathbf{N} \cdot \mathbf{L}\right] = 0 \tag{6}$$

und folgere $l_+ = l_- = \frac{n-1}{2}$, $n \in \{1, 2, ...\}$. Bringe damit den Ausdruck für E auf eine Form, die nur noch von der Hauptquantenzahl n abhängt.